Modélisation numérique : TD 3

Frédéric Hourdin
hourdin@lmd.ens.fr

5 décembre 2012

1 Calcul numérique de la diffusion

On étudie ici la diffusion d'une espèce trace

$$\frac{\partial q}{\partial t} = K \frac{\partial^2 q}{\partial x^2} \tag{1}$$

dont la concentration $q(x,t)$, en kg/kg d'air par exemple, ne dépend que de la dimension x et du temps, sur un domaine $[0, L]$ en x et $[0, T]$ en temps.

Pour le codage, on repartira du code développé pour le TD2 en prenant soin de conserver une copie de celui-ci.

1. On suppose qu'à l'instant initial, le traceur est la superposition de deux sinusoides et d'une oscillation d'un point de grille sur deux (bruit numérique comme on en rencontre souvent dans les modèles) :
   $q_{i,1} = \sin(4\pi x_i/x_{\max}) + \sin(17\pi x_i/x_{\max}) + OSC(i)/2$
   où $OSC(i) = 1$ si i impaire et -1 sinon, soit, en fortran

   ```
   pi=2.*asin(1.)
   xxx(i)=i*deltax
   qinitial(i)=sin(4*pi*xxx(i)/xmax)+sin(17*pi*xxx(i)/xmax)+0.5*(-1.+2.*mod(i,2))
   ```

   Tracer la concentration initiale du traceur.
2. Coder un schéma de diffusion avec un coefficient de diffusion K tel que $\beta = K\delta t/\delta x^2 = 0,1$ On rappelle qu'on calcule le flux $-K\partial q/\partial x$ à l'interface entre deux mailles successives. On utilisera un schéma explicite en temps.

   Il suffit de changer le calcul de la concentration initiale et le schéma numérique par rapport au programme développé pour le TD2. On pourra au choix supposer $q_{1,n} = q_{2,n}$ et $q_{im,n} = q_{im-1,n}$ (condition de flux nul aux bords) ou $q_{1,n} = 0$ et $q_{im,n} = 0$, ou encore coder un domaine périodique.

   On préfèrera coder le schéma en introduisant une variable flux, calculée à partir du gradient du traceur, puis prendre la divergence de ce flux.
3. Sont-ce les petites ou les grandes échelles qui se dissipent le plus rapidement ? Commenter par rapport à l'équation d'évolution temporelle de l'amplitude $A(t)$ d'un mode oscillant $A(T)\sin(kx)$ solution de l'équation 1.

4. Refaire tourner le calcul de dissipation sur 10 pas de temps, en sauvant le traceur à tous les pas de temps, mais avec des valeurs de β de 0,3 et 0,6. Analyser les résultats obtenus au regard d'une solution du schéma discrétisé de la forme $q_{i,n} = A_n OSC(i)$, où n est le pas de temps (faire éventuellement le lien avec les résultats du TD1).
5. A partir du même champ de concentration initiale, effectuer un calcul d'advection avec le schéma amont $q_{i,n+1} = \alpha q_{i-1,n} + (1-\alpha) q_{i,n}$ avec $\alpha = U\delta t/\delta x$ (cf. TD2 et ne pas hésiter à reprendre les lignes de code correspondant). Effectuer le calcul sur une 100 aine de pas de temps avec $\alpha = 0,2$. Comment peut-on intepréter les résultats. Montrer qu'on peut réécrire le schéma amont sous la forme $q_{i,n+1} = q_{i,n} + \alpha/2(q_{i+1,n} - q_{i-1,n}) + \xi(q_{i-1,n} - 2q_{i,n} + q_{i+1,n})$. Revenir à partir des résultats trouvés ici sur la différence entre les comportements des schémas amont et centré observés dans le TD2.

Remarque :
on pourra sortir les champs en format ascii par exemple tous les 10 pas de temps en utilisant, comme pour le TD2 :

```
character*4 file
do it=1,nt
....
    if (mod(it,10)==1) then
       file="q..."
       write(file(2:4),'(i3.3)') it
       open (10,file=file,form='formatted')
       do i=1,imax
          write(10,*) xxx(i),qqq(i)
       enddo
       close(10)
    endif
```

On peut ensuite soit tracer les courbes à l'écran avec la commande

```
xmgrace q*
```

soit également sauvegarder cette figure dans un fichier grace à la commande

```
xmgrace -hardcopy -hdevice JPEG -printfile out.jpg q*
```

(le 'q*' veut dire que vous appliquez la commande à tous les fichiers commençant par la lettre q dans le répertoire où vous vous trouvez, ici q001, q011, q021 ...). Mais n'hésitez pas à utiliser tout autre moyen de votre goût pout sortir les fichiers.